

# Tính toán hàm lượng các chất ô nhiễm trong khí thải động cơ diesel bằng phần mềm Diesel-RK

ThS. PHAN ĐẮC YẾN  
TS. NGUYỄN TRUNG KIÊN  
Học viện Kỹ thuật Quân sự

**Tóm tắt:** Bài báo giới thiệu mô hình tính toán hàm lượng các chất ô nhiễm (NO<sub>x</sub>, PM) trong khí thải động cơ diesel từ phần mềm Diesel-RK, sử dụng phần mềm để tính toán hàm lượng các chất ô nhiễm của khí thải.

**Abstract:** The paper presents a model of nitrogen oxides and PM formation in cylinder engine used in the software package Diesel-RK and results of the calculation of emissions in exhaust gas by using Diesel-RK.

## 1. Đặt vấn đề

Hiện nay, việc sử dụng phần mềm kết hợp với nghiên cứu kiểm chứng bằng thực nghiệm để nghiên cứu động cơ đốt trong là lựa chọn được coi là tối ưu của các trung tâm nghiên cứu động cơ đốt trong lớn trên thế giới. Phương pháp thực nghiệm dù cho kết quả đánh giá có độ chính xác cao, nhưng tốn kém, đòi hỏi phải có đầy đủ các thiết bị đo hiện đại với tần số lấy mẫu nhanh. Khi số lượng thông số cần xác định lớn, số phương án thực nghiệm nhiều, lượng kinh phí cần thiết sẽ rất lớn. Việc sử dụng phần mềm sẽ cho phép tiết kiệm được kinh phí, thời gian nếu cần khảo sát, đánh giá, dự báo tác động của các yếu tố khác nhau đến hoạt động của các loại động cơ lắp trên phương tiện.

Hiện nay, một trong những phần mềm được nhiều cơ sở chuyên nghiên cứu phát triển, sản xuất động cơ sử dụng là phần mềm Diesel-RK do các chuyên gia Trường Đại học Bauman (LB Nga) phát triển [6]. Chi tiết về phần mềm này đã được giới thiệu trong các bài báo [1, 2].

Trong khuôn khổ bài báo chỉ giới thiệu mô hình tính toán hàm lượng phát thải NO<sub>x</sub>, PM sử dụng trong phần mềm Diesel-RK, sử dụng phần mềm để tính toán hàm lượng các chất ô nhiễm nói trên cho động cơ diesel B2.

## 2. Cơ sở lý thuyết tính toán hàm lượng các chất ô nhiễm trong khí thải động cơ diesel trong Diesel-RK

### 2.1. Mô hình hình thành NO<sub>x</sub>

Theo lý thuyết cháy, NO<sub>x</sub> sinh ra theo 3 cơ chế: NO<sub>x</sub> nhiệt, NO<sub>x</sub> tức thời và NO<sub>x</sub> nhiên liệu. Tuy nhiên, với quá trình công tác của động cơ, nguồn chính tạo NO<sub>x</sub> là nitơ phân tử có trong không khí nạp (NO<sub>x</sub> nhiệt). Nhiên liệu diesel sử dụng cho động cơ lắp trên các phương tiện cơ giới đường bộ nói chung chứa rất ít nitơ nên ảnh hưởng của thành phần nhiên liệu đến hàm lượng NO<sub>x</sub> trong khí thải là không đáng kể [5].

Trong Diesel-RK, mô hình tính toán hàm lượng NO<sub>x</sub> trong khí thải được sử dụng là mô hình Zeldovich

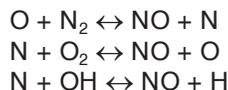
[5], theo đó khi mô phỏng quá trình hình thành NO<sub>x</sub>, xi lanh được coi như chia làm hai vùng: Vùng chưa cháy và vùng khí đã cháy. Vùng chưa cháy gồm không khí, nhiên liệu và khí sót. Trong thời gian cháy, thể tích vùng khí đã cháy tăng dần lên. Khi tính toán quá trình cháy, coi giá trị cục bộ của hệ số dư lượng không khí thay đổi tuyến tính từ giá trị  $\alpha_{ini} < 1$  đến 1. Giá trị tức thời của hệ số dư lượng không khí trong quá trình cháy  $\varphi_c$  là hàm của góc quay trục khuỷu (CA) $\varphi$ :

$$\alpha_c = \alpha_{ini} + \frac{1 - \alpha_{ini}}{\varphi_z} \varphi \quad (1)$$

Trong đó:  $\varphi_z$  - Thời gian diễn ra quá trình cháy, [độ GQTK].

Giống như hầu hết các tác giả nghiên cứu về sự hình thành NO<sub>x</sub>, Zeldovich cho rằng trong khoảng thời gian cháy của động cơ thông thường chỉ cần xem xét động học phản ứng tạo thành NO (chất chiếm tỷ lệ cao nhất trong nhóm NO<sub>x</sub>). Các thành phần còn lại (NO<sub>2</sub> và N<sub>2</sub>O) được xác định theo kết quả thống kê kinh nghiệm.

Theo Zeldovich [5], quá trình ô xi hóa nitơ diễn ra theo cơ chế dây chuyền theo 3 phản ứng thuận nghịch chính sau:



Thành phần thể tích của NO  $r_{NO}$  trong vùng cháy xác định theo công thức:

$$\frac{dr_{NO}}{d\varphi} = \frac{P \cdot 2.333 \cdot 10^7 \cdot e^{\frac{38020}{T_{SPC}}} \cdot r_{N_2,eq} \cdot r_{O_{eq}} \cdot \left[ 1 - \left( \frac{r_{NO}}{r_{NO,eq}} \right)^2 \right]}{RT_{SPC} \cdot \left( 1 + \frac{2346}{T_{SPC}} \cdot e^{\frac{3365}{T_{SPC}}} \cdot \frac{r_{NO}}{r_{NO,q}} \right)} \cdot \frac{1}{\omega} \quad (2)$$

Trong đó: P - Áp suất trong xi lanh, [Pa];  $T_{SPC}$  - Nhiệt độ trong vùng sản phẩm cháy, [°K]; R - Hằng số khí, J/(mol.°K);  $\omega$  - Vận tốc góc của trục khuỷu, [rad/s];  $r_{NO,eq}$ ,  $r_{N_2,eq}$ ,  $r_{O_{eq}}$ ,  $r_{O_2,eq}$ , tương ứng là nồng độ cân bằng của ô xit ni tơ, ni tơ phân tử, ô xy nguyên tử và ô xy phân tử.

Nồng độ NO trong xi lanh xác định theo công thức:

$$r_{NO_c} = r_{NO} \cdot r_{bc}$$

Trong đó:  $r_{bc}$  - Lượng khí đã cháy trong xi lanh

### 2.2. Tính toán độ khói khí thải (hàm lượng PM) của động cơ diesel

Việc tính toán độ khói trong Diesel-RK được thực hiện theo phương pháp của giáo sư Razleitsev [4], có tính đến ảnh hưởng của đặc điểm quá trình cháy nhiên liệu phun vào xi lanh tới việc hình thành và đốt cháy các hạt PM (Marticulate Matter). Theo GS. Razleitsev, các hạt PM được hình thành chủ yếu do 2 yếu tố:

- Do quá trình phá hủy dây chuyền các phân tử nhiên liệu, khuếch tán từ bề mặt các hạt nhiên liệu vào vùng cháy.

- Do phản ứng trùng hợp nhiệt độ cao và quá trình khử hiđrô của lõi các hạt nhiên liệu bay hơi.

Quá trình cháy các hạt PM diễn ra song song với quá trình giảm mật độ thể tích của chúng do giãn nở. Việc xây dựng các phương trình hình thành PM và đốt cháy chúng được thể hiện cụ thể trong [4], ở đây chỉ đưa ra các kết quả cuối cùng.

Tốc độ tạo PM trong vùng cháy được xác định theo (3):

$$\left(\frac{d[C]}{d\tau}\right)_K = 0,004 \frac{g_{ct}}{V} \frac{dx}{d\tau} \quad (3)$$

Trong đó:  $V$  - Thể tích tức thời của xy lanh;  $g_{ct}$  - Lượng nhiên liệu cấp cho một chu trình;  $dx/d\tau$  - Vận tốc tỏa nhiệt.

Vận tốc hình thành PM theo cơ chế trùng hợp nhân các giọt nhiên liệu tỷ lệ với vận tốc biến mất của các hạt nhiên liệu lỏng do sự bay hơi hoàn toàn của chúng. Đối với các quá trình khác nhau, chúng được tính toán theo các biểu thức khác nhau:

- Trong quá trình phun nhiên liệu:

$$\left(\frac{d[C]}{d\tau}\right)_p = 1,7 \frac{g_{ct}}{V} \frac{1 - \exp\left[1 - \left(\frac{\sqrt{K\tau}}{d_{32}}\right)^{n'}\right]}{\tau_{bp}} \quad (4)$$

Trong đó:  $\tau$  - Thời gian tính từ thời điểm bắt đầu phun;  $\tau_{bp}$  - Mức độ kéo dài của quá trình phun;  $n'$  - Đặc tính phân tán (đối với các vòi phun diesel  $n'=2-4$ );  $K$  - Hằng số bay hơi;  $d_{32}$  - Đường kính trung bình của hạt nhiên liệu (theo Sauter).

- Sau khi kết thúc quá trình phun:

$$\left(\frac{d[C]}{d\tau}\right)_p = 0,0028(1 - x_{nkp}) \frac{n' g_{ct}}{2V\tau_2} \left(\frac{\sqrt{K\tau}}{d_{32}}\right)^{n'} \exp\left(-\frac{\sqrt{K\tau}}{d_{32}}\right)^{n'} \quad (5)$$

Trong đó:  $\tau_2$  - Thời gian tính từ thời điểm kết thúc phun nhiên liệu;  $x_{nkp}$  - Lượng nhiệt tỏa ra tính đến thời điểm kết thúc phun nhiên liệu.

Vận tốc đốt cháy các hạt PM:

$$\left(\frac{d[C]}{d\tau}\right)_B = 3,1 \cdot 10^{-6} n^{0,5} p [C]$$

Trong đó:  $p$  - Áp suất tức thời trong xi lanh, [MPa];  $[C] = C/V$  - Mật độ tức thời của PM tính theo thể tích xi lanh.

Vận tốc thay đổi hàm lượng PM trong xi lanh do giãn nở:

$$\left(\frac{d[C]}{d\tau}\right)_V = 0,75 \frac{6n}{V} \frac{dV}{d\varphi} [C]$$

Tổng vận tốc thay đổi hàm lượng PM trong xi lanh:

$$\left(\frac{d[C]}{d\tau}\right) = B \left(\frac{d[C]}{d\tau}\right)_K + B \left(\frac{d[C]}{d\tau}\right)_p - \frac{1}{B} \left(\frac{d[C]}{d\tau}\right)_B - \left(\frac{d[C]}{d\tau}\right)_V \quad (6)$$

Trong đó:  $B = A (n_{dm} / n)^m$  - Hệ số rút gọn;  $n$  - Tốc độ vòng quay của trục khuỷu;  $n_{dm}$  - Tốc độ vòng quay định mức của trục khuỷu;  $A, m$  - Các hệ số thực nghiệm.

Hàm lượng PM trong khí thải (điều kiện tiêu chuẩn):

$$[C]_{Hl} = \int_{\varphi_B}^{480} \frac{d[C]}{d\tau} \frac{d\varphi}{6n} \left(\frac{0,1}{p_{480}}\right)^{\frac{1}{k}}$$

Trong đó:  $p_{480}$  - Áp suất trong xy lanh tại thời điểm 60° trước điểm chết trên;  $k$  - Hệ số đoạn nhiệt của khí thải.

Trong Diesel-RK, nồng độ  $[C]$  có thể tính theo thang đo Bosch hoặc biểu diễn theo độ khối khí thải  $k$ , [1/m].

Mức phát thải PM có thể được tính theo công thức Alkidas [4, 6] dựa theo độ khối Bosch của khí thải:

$$[PM] = 565 \left[ \ln \frac{10}{10 - Bosch} \right]^{1,206} \quad (7)$$

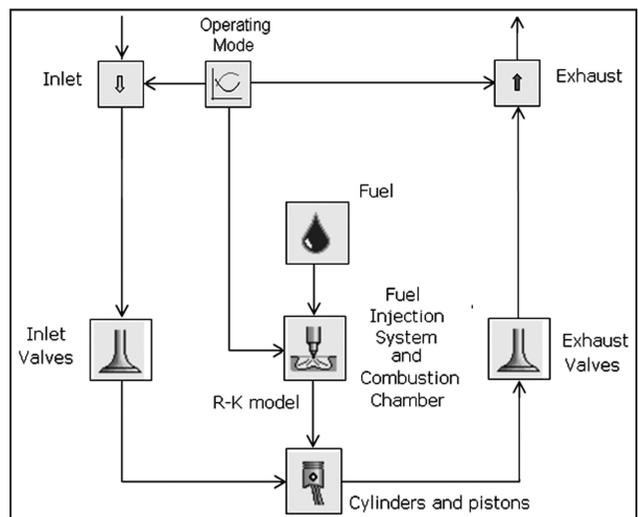
### 3. Tính toán hàm lượng các chất ô nhiễm trong khí thải động cơ diesel bằng phần mềm Diesel-RK

Động cơ được sử dụng để làm ví dụ tính toán hàm lượng các chất ô nhiễm trong khí thải là động cơ diesel 4 kỳ, 12 xy lanh bố trí hình chữ V B2 được sử dụng nhiều trên các phương tiện cơ giới quân sự [3].

**Bảng 1. Các thông số kỹ thuật chính của động cơ B2, [3]**

TT	Thông số	Giá trị	Đơn vị
1	Kích thước chính D/S	150/180	mm
2	Tỷ số nén	15	
3	$Ne_{dm}$ (tại $n = 2000$ vg/ph)	382	kW
4	$Me_{max}$ (tại $n = 1200$ vg/ph)	2158,2	N.m
5	Suất tiêu hao nhiên liệu	$\leq 251,36$	g/kWh

Phương pháp xây dựng mô hình được trình bày trong các bài báo [1,2]. Sau khi khai báo đầy đủ các thông số, ta xây dựng được mô hình tính toán động cơ diesel B2 trong phần mềm Diesel-RK như trên Hình 1.



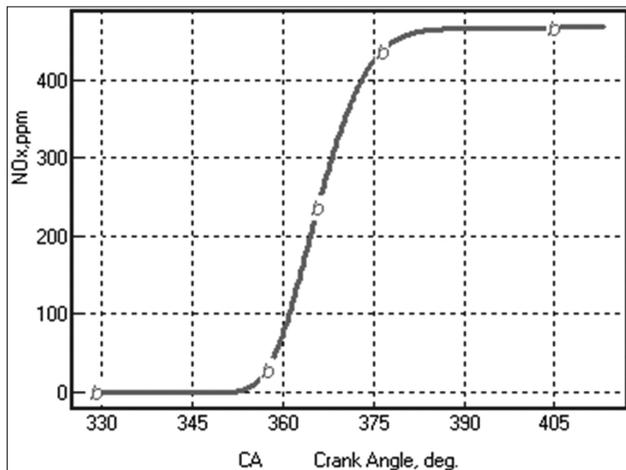
**Hình 1: Mô hình mô phỏng tính toán chu trình công tác của động cơ diesel B2 bằng phần mềm Diesel-RK**

Mô hình mô phỏng động cơ B2 đã xây dựng trong phần mềm Diesel-RK cho phép ta tính toán các chỉ tiêu kinh tế, năng lượng môi trường của động cơ. Kết quả tính toán sự hình thành các chất ô nhiễm và hàm lượng chúng trong khí thải được trình bày trên các Hình 2, 3, 4, 5

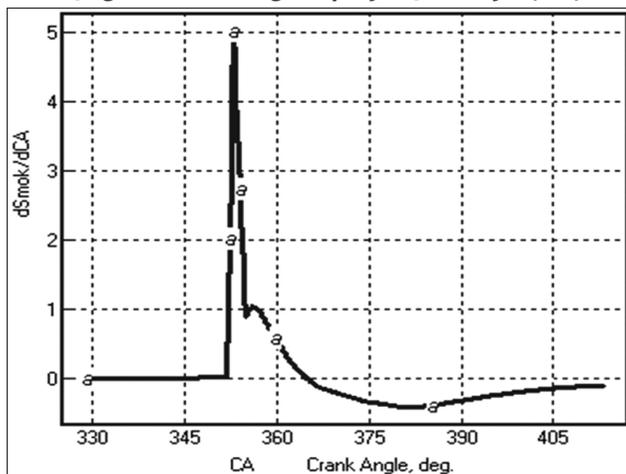
(Xem tiếp trang 51)

**TÍNH TOÁN HÀM LƯỢNG...**

(Tiếp theo trang 34)

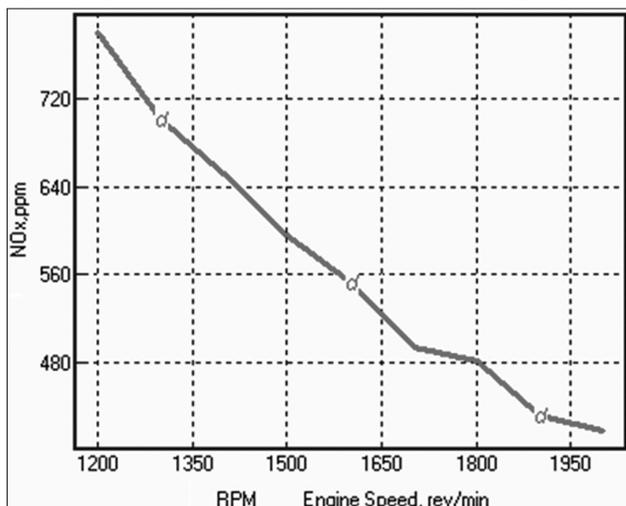


**Hình 2: Diễn biến sự hình thành NO<sub>x</sub> trong xi lanh động cơ B2 theo góc quay trục khuỷu (CA)**

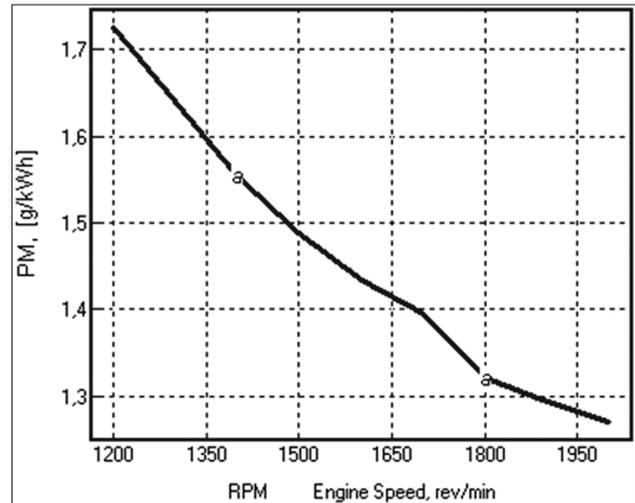


**Hình 3: Diễn biến tốc độ tạo muội dSmoke/dCA trong xi lanh động cơ B2 theo góc quay trục khuỷu (CA)**

Mô hình đã xây dựng cũng cho phép khảo sát ảnh hưởng của các yếu tố khác nhau tới mức phát thải NO<sub>x</sub>, PM trong khí thải động cơ diesel B2. Trên các Hình 3; 4 là kết quả tính toán ảnh hưởng của các chế độ tốc độ tới mức phát thải NO<sub>x</sub> và PM trong khí thải.



**Hình 4: Mức phát thải NO<sub>x</sub> của động cơ B2 theo đặc tính ngoài**



**Hình 5: Mức phát thải PM của động cơ B2 (theo đặc tính ngoài)**

**4. Kết luận**

Mô hình mô phỏng động cơ B2 trong phần mềm Diesel-RK cho phép khảo sát diễn biến sự hình thành các chất ô nhiễm trong xi lanh động cơ cũng như tính toán hàm lượng các chất ô nhiễm trong khí thải.

Những kết quả tính toán ở trên bằng phần mềm Diesel-RK đã được khẳng định bằng kết quả nghiên cứu thực nghiệm được tiến hành cho động cơ B2 tại Trung tâm Thử nghiệm Khí thải Phương tiện cơ giới đường bộ (Cục Đăng kiểm Việt Nam), do khuôn khổ bài báo, các kết quả nghiên cứu thực nghiệm với sự so sánh với tính toán lý thuyết bằng phần mềm sẽ được trình bày trong một bài báo khác □

**Tài liệu tham khảo**

- [1]. Nguyễn Công Lý, Phan Đắc Yến, Nguyễn Trung Kiên, Nguyễn Hoàng Vũ. *Mô hình hóa chu trình công tác của động cơ diesel phun nhiên liệu trực tiếp bằng phần mềm chuyên dụng Diesel-RK*. Tạp chí Khoa học Kỹ thuật, Học viện KTQS, số 140, 2011.
- [2]. Nguyen Hoang Vu, Nguyen Trung Kien, Nguyen Cong Ly, Phan Duc Yen, *Study on the Effects of Biodiesel blends B10 and B20 on Performance and Emissions of a Diesel Engine by using Diesel-RK Software*. The 5<sup>th</sup> AUN/SEED-Net Regional Conference on New/Renewable Energy School of Transportation Engineering, Hanoi University of Science and Technology, September 26-27, 2012.
- [3]. *Двигатели В-2 и В-6. Техническое описание*. М.: 1975.
- [4]. Разлейцев Н.Ф., *Моделирование и оптимизация процесса сгорания в дизелях*, Харьков, Вища школа, 1980.
- [5]. Зельдович Я.Б, Райзер Ю.П., *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений*, М. Наука, 1966.
- [6]. <http://www.diesel-rk.bmstu.ru>.

Ngày nhận bài: 25/3/2014

Ngày chấp nhận đăng: 05/04/2014

Người phản biện: PGS. TS. Đào Trọng Thắng  
PGS. TS. Hà Quang Minh